Секция 2 «Моделирование физических процессов»

Председатели:
Тюменков Геннадий Юрьевич, канд. физ.-мат. наук, доцент.
Дей Евгений Александрович, канд. физ.-мат. наук, доцент.

П. В. Асвинова
(ГГТУ имени П. О. Сухого, Гомель)
Науч. рук. **В. Ю. Гавриш,** канд. физ.-мат. наук, ст. преподаватель

ФУНКЦИЯ ГРИНА УРАВНЕНИЯ ШРЕДИНГЕРА

Введение. Задача столкновения двух частиц в классической механике с учетом прицельного расстояния и скорости частиц решается известными методами. В квантовой механике меняется сама постановка вопроса, поскольку понятие траектории, а с нею и прицельного расстояния теряет смысл.

В работе продемонстрирована процедура получения дифференциального сечения с последующим переходом расчета функции Грина. Авторы, используя методы функции комплексного переменного, получают выражения для амплитуды рассеяния плоской волны.

Связь дифференциального сечения с амплитудой рассеяния. Известно [1, 2], что свободная частица массы m описывается плоской волной. Используя нормировку, при которой плотность потока в волне равно скорости частицы $\vec{\upsilon}$ получаем, что

$$\psi^0_{\vec{k}}(\vec{r}) = \mathrm{e}^{i\vec{k}\vec{r}}. \tag{1}$$

Рассеянные частицы будут описываться расходящейся сферической волной

$$\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = \mathrm{e}^{i\vec{k}\vec{r}} + f\left(\vec{k}',\vec{k}\right)\frac{\mathrm{e}^{i\vec{k}\vec{r}}}{\vec{r}} \tag{2}$$

с функцией $f\left(\vec{k}',\vec{k}\right)$, которую называют амплитудой рассеяния. После некоторых вычислений для падающей (1) и рассеянной волны (2) следует выражение [1] для дифференциального сечения

$$d\sigma = \left| f\left(\vec{k}',\vec{k}\right) \right|^2 \ d\Omega. \tag{3}$$

Из соотношения (3) следует, что задача о вычислении сечения рассеяния сводится к поиску амплитуды рассеяния $f\left(\vec{k}',\vec{k}\right)$.

Функция Грина свободной частицы. Свободная частица описывается уравнением Шредингера

$$\hat{H}_0 \ \psi^0_{\vec{k}}(\vec{r}) = E \ \psi^0_{\vec{k}}(\vec{r}), \tag{4}$$

где $\hat{H}_0$ – гамильтониан. Для свободной частицы гамильтониан представлен оператором кинетической энергии

$$\hat{H}_0 = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta. \tag{5}$$

Волновая функция, соответствующая выражению (5), определяется формулой (1).

В случае наличия оператора взаимодействия $\hat{V} = V(\vec{r})$ уравнение Шредингера принимает вид

$$\left(\hat{H}_0 + \hat{V}\right) \ \psi(\vec{r}) = E \ \psi(\vec{r}). \tag{6}$$

Для простоты будем полагать, что взаимодействие исчезает на больших расстояниях от силового центра, т.е. $V(\vec{r} \to \infty) = 0$. Перепишем (6) в виде

$$\left(\hat{H}_0 - E\right) \ \psi(\vec{r}) = - \ \hat{V} \ \psi(\vec{r}), \tag{7}$$

решение которого будем проводить методом функции Грина. Для этого перейдем от дифференциального уравнения Шредингера к эквивалентному интегральному уравнению

$$\psi(\vec{r}) = \mathrm{e}^{i\vec{k}\vec{r}} + \int G_0(E,\vec{r},\vec{r}')\, V(\vec{r}')\psi(\vec{r}')d\vec{r}', \tag{8}$$

где $G_0(E,\vec{r},\vec{r}')$ – функция Грина, соответствующая оператору $\hat{H}_0$ и удовлетворяющая уравнению

$$\left(E - \hat{H}_0\right)\, G_0(E,\vec{r},\vec{r}') = \delta(\vec{r} - \vec{r}') \tag{9}$$

с дельта-функцией Дирака $\delta(\vec{r} - \vec{r}')$ [2]. Легко убедиться, что если $G_0(E,\vec{r},\vec{r}')$ является функция Грина, соответствующая оператору $\hat{H}_0$, то справедливо так называемое спектральное разложение, или спектральное представление функции Грина [1]

$$G_0(E,\vec{r},\vec{r}') = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\psi_n^0(\vec{r})\psi^{*0}_n(\vec{r}')}{E_0 - E_n}, \tag{10}$$

которое в случае непрерывного спектра $\hat{H}_0$ определяется интегралом вида

$$G_0(E,\vec{r},\vec{r}') = \int \frac{\psi_\chi^0(\vec{r})\psi^{*0}_\chi(\vec{r}')}{E_0 - E_n} \frac{d\vec{\chi}}{(2\pi)^3}. \tag{11}$$

Выполняя несложные преобразования, связанные с интегрированием по направлениям вектора $\vec{\chi}$, получаем выражение

$$G_0(E,\vec{r},\vec{r}') = \frac{m}{2\pi^2\hbar^2} \frac{1}{i\left|\vec{r} - \vec{r}'\right|} \int \frac{\mathrm{e}^{i|\vec{\chi}||\vec{r}-\vec{r}'|}}{\frac{2mE_0}{\hbar^2} - |\,\vec{\chi}\,|^2} \frac{d\vec{\chi}}{(2\pi)^3}, \tag{12}$$

в котором было учтено, что $|\,\vec{k}\,| = \sqrt{2mE_0/\hbar^2}$.

Выражение (12) не определяют функции Грина однозначно. Рассмотрим два способа обхода полюсов: добавим к положительной вещественной величине E_0 малую добавку $\pm i\varepsilon$. Соответствующие выражения для функции Грина обозначим индексами (+) или (–):

$$G_0^{(\pm)}(E,\vec{r},\vec{r}') = \lim_{\varepsilon\to 0} G_0(E \pm i\varepsilon,\vec{r},\vec{r}'), \tag{13}$$

которое с помощью техники вычетов [3] приводит к

$$G_0^{(+)}(E,\vec{r},\vec{r}\,') = -\frac{m}{2\pi\hbar^2}\frac{e^{i|\vec{k}||\vec{r}-\vec{r}\,'|}}{|\vec{r}-\vec{r}\,'|},$$
$$G_0^{(-)}(E,\vec{r},\vec{r}\,') = -\frac{m}{2\pi\hbar^2}\frac{e^{-i|\vec{k}||\vec{r}-\vec{r}\,'|}}{|\vec{r}-\vec{r}\,'|}. \qquad (14)$$

Случай расходящейся волны соответствует $G_0^{(+)}(E,\vec{r},\vec{r}\,')$; с учетом (8) приходим к

$$\psi(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\vec{r}} - \int \frac{m}{2\pi\hbar^2}\frac{e^{i|\vec{k}||\vec{r}-\vec{r}\,'|}}{|\vec{r}-\vec{r}\,'|}V(\vec{r}\,')\psi(\vec{r}\,')d\vec{r}\,', \qquad (15)$$

откуда путем сравнения с общим выражением (2) получаем, что амплитуда рассеяния определяется функцией Грина (14) и явным видом оператора взаимодействия $\hat{V} = V(\vec{r})$.

Решение интегрального уравнения (15) даже в случае простейшего оператора $\hat{V} = V(\vec{r})$ проводят приближенно методом итераций, поэтому указанные расчеты в силу громоздких выражений в работе проводится не будут.

Заключение. В работе получен явный вид функции Грина уравнения Шредингера. Полученные выражения могут быть использованы для решения задач рассеяния на кулоновском потенциале, а также для других часто используемых потенциалов в физических приложениях.

Литература

1. Ландау, Л. Д., Лифшиц, Е. М. Курс теоретической физики в 10 томах. Т.3. Квантовая механика / Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц. – Москва: Физматлит, 2008. – 800 с.
2. Владимиров, В. С. Уравнения математической физики / В. С. Владимиров. – Москва: Наука, 1967. – 436 с.
3. Лаврентьев, М. А., Шабат, Б. В. Методы теории функций комплексного переменного/ М. А. Лаврентьев, Б. В. Шабат. – Москва: Наука, 1973. – 749 с.